

УДК 517.958:532.72

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ ДОМІШКОВОЇ РЕЧОВИНИ У ДВОФАЗНОМУ ПІВПРОСТОРІ З ЕРЛАНГІВСЬКИМ РОЗПОДІЛОМ ВКЛЮЧЕНЬ

Є.Я. ЧАПЛЯ, О.Ю. ЧЕРНУХА, Ю.І. БІЛУЩАК

Досліджено процеси дифузії домішкової речовини у двофазному півпросторі випадково неоднорідної шаруватої структури з урахуванням умов неідеального масового контакту на границях розділу фаз. Шаруваті включення розташовано за ерлангівським розподілом. Отримано рівняння масопереносу для усього тіла, що враховує стрибки шуканої функції та її похідної на міжфазних границях. Сформульовано еквівалентне інтегродиференціальне рівняння, розв'язок якого побудовано у вигляді інтегрального ряду Неймана. Усереднення отриманого розв'язку проведено за ансамблем конфігурацій фаз з ерлангівською функцією розподілу. Визначено вплив характеристик матеріалу на поведінку та величину усередненого поля концентрації домішкових частинок.

ВСТУП

Процеси дифузії лежать в основі багатьох технологій, зокрема, спікання порошків, хіміко-термічної обробки металів (азотування і цементування сталей), гомогенізації сплавів, металізації та зварювання матеріалів. Роль докладного вивчення процесів дифузії значно зросла зі створенням нано матеріалів та композитних матеріалів із заданими властивостями.

Математичний опис цих процесів базується на відповідних задачах математичної фізики для конкретних фізичних систем. При цьому у випадку дослідження шаруватих структур, часто невідомі їх геометричні параметри [1, 2], проте достатньо повно встановлено дифузійні властивості окремих елементів та умови контакту між ними.

У зв'язку з цим слід оцінити вплив просторових реалізацій структури середовища [3] та умов міжфазного контакту на описувані фізичні процеси.

У цій роботі розв'язано контактну-крайову задачу дифузії у двофазному випадково неоднорідному багатошаровому півпросторі. При цьому рівняння дифузії в контактуючих галузях сформульовано з використанням кінетичних коефіцієнтів переносу, що при зведенні задачі до еквівалентного інтегродиференціального рівняння призводить до врахування похідної за часом у його операторі. Визначено вплив характеристик матеріалу на поведінку і величину усередненого поля концентрації домішкових частинок.

ОБ'ЄКТ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Нехай домішкові частинки одного хімічного сорту мігрують у шаруватому півпросторі, який складається з підшарів двох типів (фаз). Вважаємо, що дифузійні властивості фаз можуть суттєво відрізнятися. Приймаємо, що об'єм, який займає одна з фаз (матриця), є набагато більшим ніж об'єм іншої

фази (включень). При цьому координати включень, а отже і підшарів матриці, є невідомими, тобто структура тіла є випадково неоднорідною. Нехай включення розташовані в області тіла за ерлангівським розподілом [4] з параметрами (n, μ) , який описує проміжок до появи (реалізації) n подій процесу Пуассона з параметром μ (рис. 1).

Густина ерлангівського розподілу зі ступенями вільності n в загальному випадку має вигляд

$$f(z) = \begin{cases} (n\mu)^n z^{n-1} e^{-n\mu z} / \Gamma(n), & z \geq 0; \\ 0, & z < 0, \end{cases} \quad (1)$$

де $\Gamma(n)$ — гама-функція; $n \in \mathbb{N}$; $\mu > 0$.

Зазначимо, що у випадку $n=1$ ерлангівський розподіл співпадає з експоненціальним (рис. 1, а), густина якого є $f(z) = \mu e^{-\mu z}$, $z \geq 0$, а при $n \rightarrow \infty$ цей розподіл прямує до виродженого [4].

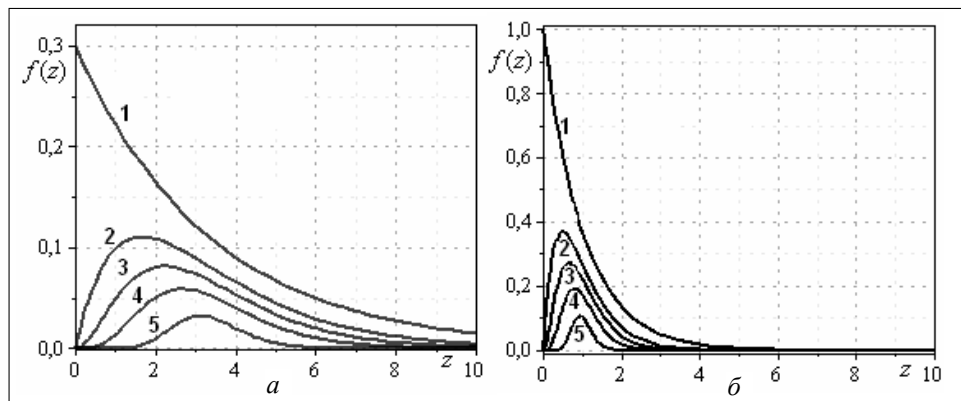


Рис. 1. Густина ерлангівського розподілу для різних значень параметра n при $\mu = 0,3$ (а) та $\mu = 1$ (б). Криві 1–5 відповідають значенням $n = 1, 2, 3, 5, 15$

Зауважимо, що зі збільшенням n функція густини ерлангівського розподілу (1) зменшується на всьому проміжку і прямує до симетричного вигляду, при цьому її максимум також зменшується і зсувається в глиб тіла (рис. 1). Це означає, що, якщо при $n=1$ (експоненціальний розподіл) включення в основному розташовуються біля поверхні півпростору (рис. 2, а), то з ростом n область найбільш імовірного знаходження включень зсувається вглиб тіла, причому тут спостерігається ущільнення підшарів (рис. 2, б).

Зміна параметра μ густини ерлангівського розподілу (1) не приводить до зміни поведінки функції $f(z)$ (рис. 1, а та 1, б), впливаючи тільки на кількісні характеристики розподілу. Зокрема, з ростом μ область ймовірного знаходження включень зсувається до поверхні півпростору (рис. 1, а та 1, б).

Процес міграції домішки в такому тілі описують рівняння дифузії, сформульовані для кожної фази зокрема. А саме

$$\rho_j \frac{\partial c_j(z, t)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c_j(z, t)}{\partial z^2}, \quad z \in \Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij}, \quad t \in [0, \bar{t}] \quad (\bar{t} < \infty), \quad j = 0, 1, \quad (2)$$

де $c_j(z, t)$ — концентрація домішкових частинок у фазі j ; ρ_j — густина; d_j — кінетичний коефіцієнт переносу в області Ω_j , яку займає фаза j ;

n_j — кількість підшарів фази j ; Ω_{ij} — i -та однозв'язна область фази j , $i = \overline{1, n_j}$, $j = 0, 1$; z — просторова координата, t — час.

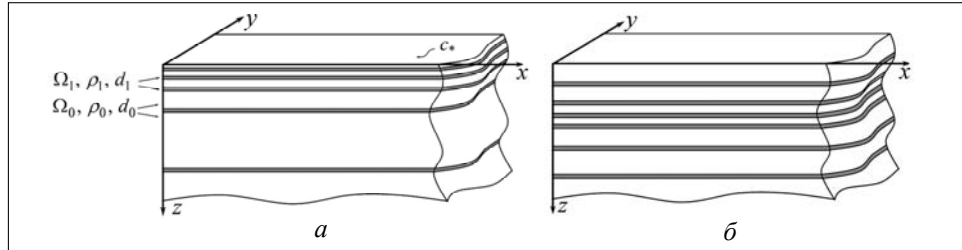


Рис. 2. Можливі реалізації структури багат шарового півпростору для ерлангівського розподілу включень при $n = 1$ (а) та $n \geq 2$ (б)

Приймаємо, що на границі тіла $z = 0$ підтримується постійне значення концентрації домішкової речовини c^* , а при $z \rightarrow \infty$ концентрація дорівнює нулю, тобто

$$c_0(z, t)|_{z=0} = c^* \equiv \text{const}, \quad c_0(z, t)|_{z \rightarrow \infty} = 0. \quad (3)$$

Також накладена нульова початкова умова:

$$c_0(z, t)|_{t=0} = c_1(z, t)|_{t=0} = 0. \quad (4)$$

На границях поділу областей $z = z_l$ та $z = z_l + h_{l1}$ (де h_{l1} — товщина включення Ω_{l1} , l — номер підшару, $l = \overline{1, n_1}$, n_1 — кількість включень) виконуються умови рівності хімічних потенціалів та дифузійних потоків частинок домішкової речовини. Якщо прийняти лінійну залежність хімічного потенціалу від концентрації, то отримуємо умови неідеального контакту для функції концентрації у вигляді [5]

$$k_0 c_0|_{z=z_l-0} = k_1 c_1|_{z=z_l+0}, \quad \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z} \Big|_{z=z_l-0} = \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z} \Big|_{z=z_l+0}; \quad (5)$$

$$k_1 c_1|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad (6)$$

де k_j — коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу у фазі j [6], z_l — випадкова координата «верхньої» межі шару Ω_{l1} .

Зазначимо, що за такої постановки задачі випадковими величинами є границі контакту прошарків $z = z_l$ та $z = z_l + h_{l1}$, тобто межі областей Ω_{i0} та Ω_{i1} , які є внутрішніми для тіла. Це, у свою чергу, призводить до стохастичності поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує в тілі.

РІВНЯННЯ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ ДЛЯ УСЬОГО ТІЛА

Розв'язок сформульованої контактної-крайової задачі (2)–(6) будемо шукати у вигляді інтегрального ряду Неймана [7], оскільки таке подання випадкових полів є зручним для проведення процедури усереднення за ансамблем

конфігурацій фаз. Для цього введемо у розгляд випадкову функцію просторової координати $c(z, t)$, яка описує поле концентрації в усьому тілі:

$$c(z, t) = \begin{cases} c_j(z, t) - \text{розв'язки рівнянь (2), } z \in \Omega_j; \\ \text{контактні умови (5), } z = z_l; \\ \text{контактні умови (6), } z = z_l + h_{l1}. \end{cases} \quad (7)$$

Знайдемо похідну за просторовою координатою від функції (7), приймаючи до уваги, що функція $c(z, t)$ в області тіла має розриви I-го роду (перші співвідношення умов (5), (6)). Враховуючи формули диференціювання розривних функцій [8], для цього випадку маємо:

$$\frac{\partial c}{\partial z} = \left\{ \frac{\partial c}{\partial z} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \sum_{l=1}^{n_1} \left([c(z, t)]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + [c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) \right), \quad (8)$$

де $\{\dots\}_{z \in \Omega_{ij}}$ — області неперервності функції, $[\dots]_{z=z_l}$ — стрибок функції I-го роду в точці $z = z_l$, $\delta(z)$ — дельта-функція Дірака.

Знайдемо другу похідну за змінною z від функції $c(z, t)$. Оскільки $\partial c(z, t)/\partial z$ теж має розриви I-го роду (другі співвідношення умов (5), (6)), то для диференціювання функції (8) також використовуємо формули диференціювання розривних функцій [8]. Маємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = & \left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + [c(z, t)]_{z=z_l} \delta'(z - z_l) \right) + \\ & + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) + [c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right), \quad (9) \end{aligned}$$

де $\delta'(x)$ — похідна від дельта-функції Дірака.

Коефіцієнти $\rho(z)$ та $d(z)$ означені у відкритих областях Ω_0 та Ω_1 :

$$\rho(z) = \sum_{i=1}^{n_1} \{\rho_0\}_{z \in \Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1} \{\rho_1\}_{z \in \Omega_{i1}}, \quad d(z) = \sum_{i=1}^{n_1} \{d_0\}_{z \in \Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1} \{d_1\}_{z \in \Omega_{i1}}. \quad (10)$$

При цьому на границях контакту $z = z_l$ та $z = z_l + h_{l1}$ відбувається стрибок цих коефіцієнтів $[\rho(z)]_{z=z_l} = -[\rho(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = \rho_1 - \rho_0$, $[d(z)]_{z=z_l} = -[d(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = d_1 - d_0$, $l = \overline{1, n_1}$.

З урахуванням співвідношень (9), (10) рівняння дифузії для тіла в цілому запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} \rho(z) \frac{\partial c}{\partial t} = & d(z) \left[\left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + [c(z, t)]_{z=z_l} \delta'(z - z_l) \right) + \right. \\ & \left. + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) + [c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right) \right]. \quad (11) \end{aligned}$$

Зауважимо, що функції $\rho(z)$ та $d(z)$ є випадковими функціями просторової координати.

ЗВЕДЕННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ ДО ІНТЕГРОДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО РІВНЯННЯ

Введемо до розгляду випадкову функцію просторової координати («функцію структури») [9]

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z \in \Omega_{ij}; \\ 0, & z \notin \Omega_{ij}. \end{cases} \quad (11)$$

Причому

$$\sum_{j,i} \eta_{ij}(z) = 1, \quad (12)$$

тобто виконується умова суцільності тіла. У випадку, який розглядається (одновимірний за просторовою координатою, тобто шарувате тіло), функцію форми (11) можна подати як різницю двох випадкових функцій Хевісайда [10].

Коефіцієнти рівняння (10) запишемо через функцію (11)

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(z), \quad d(z) = \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(z) \quad (13)$$

та підставимо таке подання (13) у рівняння (10). Тоді з використанням умови (12) маємо

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} &= \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(z) \left[\left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \right. \\ &+ \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + [c(z, t)]_{z=z_l} \delta'(z - z_l) \right) + \\ &\left. + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) + [c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right) \right]. \quad (14) \end{aligned}$$

Якщо позначити оператор рівняння (14) через $L(z, t)$, тобто

$$\begin{aligned} L(z, t) \equiv & \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} - \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(z) \left[\left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \right. \\ &+ \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + []_{z=z_l} \delta'(z - z_l) \right) + \\ &\left. + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) + []_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right) \right], \quad (15) \end{aligned}$$

тоді рівняння (14) можна подати у вигляді

$$L(z, t)c(z, t) = 0. \quad (16)$$

У рівнянні (16) додамо і віднімемо детермінований оператор дифузії $L_0(z, t) = \rho_0 \partial/\partial t - d_0 \partial^2/\partial z^2$, коефіцієнти якого є характеристиками матеріалу фази Ω_0 . Тоді маємо

$$L_0(z, t)c(z, t) = L_s(z, t)c(z, t), \quad (17)$$

де $L_s(z, t) = L_0(z, t) - L(z, t)$ — оператор, який із використанням умови (12) можна подати так

$$\begin{aligned} L_s(z, t) = & (\rho_0 - \rho_1) \sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} - (d_0 - d_1) \sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} - \\ & - \sum_{j=0}^1 \sum_i^{n_1} d_j \eta_{ij}(z) \left[\sum_l^{n_1} \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) - []_{z=z_l} \delta'(z - z_l) + \right. \\ & \left. + \sum_l^{n_1} \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) - []_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right]. \quad (18) \end{aligned}$$

Вважаємо праву частину рівняння (17) джерелом, тобто неоднорідність середовища розглядаємо як внутрішні джерела. Тоді розв'язок крайової задачі (17), (3), (4) можна подати у вигляді суми розв'язку однорідної крайової задачі і згортки функції Гріна з джерелом:

$$c(z, t) = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') c(z', t') dz' dt', \quad (19)$$

де $c_0(z, t)$ — розв'язок однорідного рівняння дифузії з коефіцієнтами, які є характеристиками матриці Ω_0 , за крайових умов (3), (4), тобто [11]:

$$c_0(z, t) = c_* \operatorname{erfc} \left\{ z \sqrt{\rho_0 / 4d_0 t} \right\}, \quad (20)$$

де $G(z, z', t, t')$ — функція Гріна задачі (17), (3), (4). Функція Гріна є розв'язком відповідної крайової задачі з точковим джерелом і нульовими крайовими умовами:

$$\rho_0 \frac{\partial G(z, z', t, t')}{\partial t} - d_0 \frac{\partial^2 G(z, z', t, t')}{\partial z^2} = \delta(t - t') \delta(z - z'); \quad (21)$$

$$G(z, z', t, t')|_{z=0} = G(z, z', t, t')|_{z \rightarrow \infty} = 0, \quad G(z, z', t, t')|_{t=0} = 0. \quad (22)$$

Розв'язком задачі (21), (22) є функція [6]:

$$G(z, z', t, t') = \frac{\theta(t - t')}{2\sqrt{\pi\rho_0 d_0(t - t')}} \left(\exp \left(-\frac{(z - z')^2 \rho_0}{4d_0(t - t')} \right) - \exp \left(-\frac{(z + z')^2 \rho_0}{4d_0(t - t')} \right) \right). \quad (23)$$

Таким чином ми побудували інтегродиференціальне рівняння (19), еквівалентне вихідній контактній крайовій задачі. Рівняння (19) з випадковим ядром є рівнянням Вольтерра II-го роду за часовою змінною і Гаммерштейна за просторовою.

РЯД НЕЙМАНА. УСЕРЕДНЕННЯ ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ ЗА АНСАМБЛЕМ КОНФІГУРАЦІЙ ФАЗ

Розв'язок інтегродиференціального рівняння (19) шукаємо у вигляді ряду Неймана [7, 9], який будемо ітеруванням співвідношення (19).

Оскільки рівняння (19) справедливе для всіх точок області $\{t \in [0; \bar{t}], z \in [0; \infty)\}$, то воно справджується і для $z = z', t = t'$. Тоді

$$c(z', t') = c_0(z', t') + \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c_0(z'', t'') dz'' dt''.$$

Підставимо цей вираз у праву частину (19), отримаємо

$$\begin{aligned} c(z, t) = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') c_0(z', t') dz' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c(z'', t'') dz'' dt'' dz' dt'. \end{aligned} \quad (24)$$

Запишемо значення поля концентрації $c(z, t)$ у точці (z'', t'') й підставимо його у праву частину (24), тоді одержимо другу ітерацію. Повторюючи таку процедуру нескінченну кількість разів, отримаємо інтегральний ряд Неймана, а саме

$$\begin{aligned} c(z, t) = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') c_0(z', t') dz' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c_0(z'', t'') dz'' dt'' dz' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') \int_0^{t''} \int_0^\infty G(z'', z''', t'', t''') L_s(z''', t''') \times \\ \times c_0(z''', t''') dz''' dt''' dz'' dt'' dz' dt' + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

У подальшому для знаходження середнього поля концентрації домішкової речовини обмежимося першими двома членами ряду Неймана.

Врахувавши вигляд оператора $L_s(z', t')$ (18) і неперервність функції концентрації $c_0(z, t)$ на всьому проміжку отримаємо наближену формулу для випадкового поля концентрації домішкової речовини:

$$\begin{aligned} c(z, t) \approx c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') \sum_{i=1}^{n_1} \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \\ \left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \eta_{i1}(z') dz' dt'. \end{aligned} \quad (26)$$

Усереднимо вираз (26) за ансамблем конфігурацій фаз із ерлангівською функцією розподілу включень (1).

Оскільки $c_0(z, t)$ є не випадковою функцією, то

$$\langle c_0(z, t) \rangle_{\text{conf}} = c_0(z, t).$$

Усереднимо другий доданок виразу (26). Врахуємо, що

$$\eta_{i1}(z') = \begin{cases} 1, & z' \in [z_{i1}; z_{i1} + h] \\ 0, & z' \notin [z_{i1}; z_{i1} + h] \end{cases} = \begin{cases} 1, & z' - z_{i1} \in [0; h] \\ 0, & z' - z_{i1} \notin [0; h] \end{cases} = \eta_{i1}(z' - z_{i1}), \quad (i = \overline{1, n_1}) \quad (27)$$

і в підінтегральному виразі співвідношення (26) від випадкових величин (координат границь контакту z_{i1} , $i = \overline{1, n_1}$) залежить тільки функція $\eta_{i1}(z')$, а також немає інших членів із індексом i , тоді всі множники та знак суми можемо винести за знак середнього:

$$\begin{aligned} \langle I \rangle_{\text{conf}} = & \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \\ & \left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z') \frac{(n\mu)^n}{\Gamma(n)} z_{i1}^{n-1} e^{-n\mu z_{i1}} dz_{i1} dz' dt'. \quad (28) \end{aligned}$$

Зазначимо, що ми прийняли $h \approx h_{i1}$, $\forall i = \overline{1, n_1}$, h — характерна (середня) товщина прошарків.

Враховуючи властивості функції $\eta_{i1}(z')$ (27) і використовуючи в інтегралі заміну змінних $x = z' - z_{i1}$, можемо записати

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^\infty \eta_{i1}(z' - z_{i1}) \frac{(n\mu)^n z_{i1}^{n-1} e^{-n\mu z_{i1}}}{\Gamma(n)} dz_{i1} = \\ & = \sum_{i=1}^{n_1} \int_{z'-\infty}^{z'} \eta_{i1}(x) \frac{(n\mu)^n (z' - x)^{n-1} e^{-n\mu(z'-x)}}{\Gamma(n)} dx = \\ & = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \frac{(n\mu)^n (z' - x)^{n-1} e^{-n\mu(z'-x)}}{\Gamma(n)} dx, \quad (29) \end{aligned}$$

оскільки $\eta_{i1}(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0; h] \\ 0, & x \notin [0; h] \end{cases}$. Зауважимо, що змінна зовнішнього інтегрування z' приймає значення від 0 до ∞ , тоді можливі два випадки:

- $z' < h$ та інтеграл (29) набуває значення

$$\int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \frac{(n\mu)^n (z' - x)^{n-1} e^{-n\mu(z'-x)}}{\Gamma(n)} dx = \frac{1}{\Gamma(n)} \gamma(n, n\mu z');$$

- $z' \geq h$, тоді отримаємо

$$\int_0^h \eta_{i1}(x) \frac{(n\mu)^n (z' - x)^{n-1} e^{-n\mu(z'-x)}}{\Gamma(n)} dx = \frac{1}{\Gamma(n)} [\gamma(n, n\mu z') - \gamma(n, n\mu(z' - h))],$$

де $\gamma(\lambda, \alpha x) = \frac{1}{\alpha^\lambda} \int_0^x t^{\lambda-1} e^{-\alpha t} dt$ — неповна гама-функція [10].

У результаті інтеграл (29) знаходимо у формі

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \frac{(n\mu)^n (z' - x)^{n-1} e^{-n\mu(z'-x)}}{\Gamma(n)} dx =$$

$$= \begin{cases} n_1 \gamma(n, n\mu z') / \Gamma(n), & z' < h, \\ n_1 [\gamma(n, n\mu z') - \gamma(n, n\mu(z' - h))] / \Gamma(n), & z' \geq h. \end{cases}$$

Тоді усереднена функція (28) набуде вигляду

$$\langle I \rangle_{conf} = n_1 \left(\int_0^t \int_0^h G(z, z', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \right.$$

$$\left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \gamma(n, n\mu z') dz' + \int_h^\infty G(z, z', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right.$$

$$\left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] [\gamma(n, n\mu z') - \gamma(n, n\mu(z' - h))] dz' \Big] dt' \Big).$$

Як наслідок для усередненого поля концентрації домішкових частинок отримаємо

$$\langle c(z, t) \rangle_{conf} = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^h G \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} \right] Q_1(z') n_1 dz' +$$

$$+ \int_h^\infty G \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} \right] Q_2(z') n_1 dz' \Big] dt', \quad (30)$$

де

$$Q_1(z') = \frac{n-1}{\Gamma(n)} - \frac{(n\mu)^n}{\Gamma(n)} \left(e^{-n\mu z'} \left[\frac{z'^{n-1}}{n\mu} + \sum_{k=1}^{n-1} (-1)^k \frac{(n-1)(n-2)\dots(n-k)}{(n\mu)^{k+1}} z'^{n-k-1} \right] \right);$$

$$Q_2(z') = \frac{(n\mu)^n}{\Gamma(n)} \left(e^{-n\mu(z'-h_{i1})} \left[\frac{(z' - h_{i1})^{n-1}}{n\mu} + \right. \right.$$

$$\left. + \sum_{k=1}^{n-1} (-1)^k \frac{(n-1)(n-2)\dots(n-k)}{(n\mu)^{k+1}} (z' - h_{i1})^{n-k-1} \right] -$$

$$\left. - e^{-n\mu z'} \left[\frac{z'^{n-1}}{n\mu} + \sum_{k=1}^{n-1} (-1)^k \frac{n-1(n-2)\dots(n-k)}{(n\mu)^{k+1}} z'^{n-k-1} \right] \right).$$

Таким чином ми отримали формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному багатозаровому півпросторі з ерлангівським розподілом включень в області тіла.

Підставляючи у співвідношення (30) вирази для концентрації домішкової речовини в однорідному півпросторі (20) та функції Гріна (23), отримаємо розрахункову формулу в загальному випадку:

$$\begin{aligned}
 \langle c(z, t) \rangle_{\text{conf}} / c_* &= \text{erfc} \left(\frac{z d_\rho}{2\sqrt{t}} \right) + \\
 &+ n_1 \int_0^t \left[\int_0^h \frac{d_t^{-2}}{2\rho_0 \sqrt{\pi}} \left(e^{-\frac{(z-z')^2}{4d_t^2}} - e^{-\frac{(z+z')^2}{4d_t^2}} \right) \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{z' c^* d_\rho}{2\sqrt{\pi} t'^3} \times \right. \right. \\
 &\times e^{-\frac{d_\rho^2 z'^2}{4t'}} - (d_0 - d_1) \frac{z' c^* d_\rho^3}{2\sqrt{\pi} t'^3} e^{-\frac{d_\rho^2 z'^2}{4t'}} \left. \right] Q_1(z') dz' + \\
 &+ \int_h^\infty \frac{d_t^{-2}}{2\rho_0 \sqrt{\pi}} \left(e^{-\frac{(z-z')^2}{4d_t^2}} - e^{-\frac{(z+z')^2}{4d_t^2}} \right) \times \\
 &\times \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{z' c^* d_\rho}{2\sqrt{\pi} t'^3} e^{-\frac{d_\rho^2 z'^2}{4t'}} - (d_0 - d_1) \frac{z' c^* d_\rho^3}{2\sqrt{\pi} t'^3} e^{-\frac{d_\rho^2 z'^2}{4t'}} \right] Q_2(z') dz' \left. \right] dt', \quad (31)
 \end{aligned}$$

де $d_\rho^2 = \rho_0 / d_0$; $d_t = \sqrt{d_0(t-t') / \rho_0}$.

Для конкретного значення параметра n функції ерлангівського розподілу (1) у формулі (31) можна взяти інтеграли за просторовою змінною. Зокрема одержимо для $n=1$ (експоненціальний розподіл, рис. 2, а):

$$\begin{aligned}
 \langle c(z, t) \rangle / c_* &= \text{erfc} \left(\frac{z d_\rho}{2\sqrt{t}} \right) + \frac{q n_1}{2\sqrt{\pi}} e^{-d_\rho^2 z^2 / 4t} \left[(\text{erf}(a_-(z, t)) + \text{erf}(a_+(z, t))) \times \right. \\
 &\times (e^{n\mu h} - 1) \left(\sqrt{\pi} (e^{u_+(z, t)} - e^{u_-(z, t)}) / 8 - d_\rho (e^{z\mu n} - e^{-zn\mu}) e^{-(n\mu)^2 d_\rho^2 (t+1)} / (2n\mu) \right) + \\
 &+ t^{-1} \left(z d_\rho \int_0^t (\text{erf}(A_-(t, t')) - \text{erf}(A_+(t, t'))) dt' + \right. \\
 &+ \int_0^t M_-(t, t') e^{b_-(t, t')} (\text{erf}(B_-(t, t')) - e^{n\mu h} \text{erf}(K(t, t') - B_-(t, t'))) dt' + \\
 &\left. \left. + \int_0^t M_+(t, t') e^{b_+(t, t')} (\text{erf}(B_+(t, t')) - e^{n\mu h} \text{erf}(K(t, t') + B_+(t, t'))) dt' \right) \right],
 \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 q &= d_1 / d_0 + \rho_1 / \rho_0; \quad a_\pm(z, t) = n\mu \sqrt{t} d_\rho^{-1} / 2 \pm z d_\rho / 2\sqrt{t}; \\
 u_\pm(z, t) &= d_0 (n\mu t \pm z d_\rho^2)^2 / 4\rho_0 t; \quad b_\pm(t, t') = d_\rho^{-2} (n\mu)^2 t'(t-t') / t \pm zn\mu t'; \\
 K(t, t') &= h d_t^{-1} \sqrt{t/t'} / 2; \quad A_\pm(t, t') = K(t, t') \pm z d_t^{-1} \sqrt{t/t'} / 2; \\
 M_\pm(t, t') &= \sqrt{\rho_0 / 4d_0} (z/2 \pm n\mu d_t^2); \quad B_\pm(t, t') = (z d_t^{-1} / 2 \pm n\mu d_t) \sqrt{t'/t}.
 \end{aligned}$$

Для $n = 2$ (рис. 2, b):

$$\begin{aligned} \langle c(z, t) \rangle / c_* = \operatorname{erfc} \left(\frac{z d_\rho}{2 \sqrt{t}} \right) + \frac{q n_1}{4 \sqrt{\pi}} e^{-d_\rho^2 z^2 / 4 t} \int_0^t \left[\exp(z^2 t') (Y_{1-}(t, t') - Y_{1+}(t, t')) - \right. \\ \left. - (Y_{2-}(t, t') + Y_{2+}(t, t')) - \alpha(t, t') (Y_{3-}(t, t') - Y_{3+}(t, t')) + \right. \\ \left. + (e^{-\lambda h} - 1) \alpha(t, t') (Y_{4-}(t, t') - Y_{4+}(t, t')) + \right. \\ \left. + (e^{-\lambda h} (1 - \lambda h) - 1) (Y_{5-}(t, t') + Y_{5+}(t, t')) \right] dt'. \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} Y_{1\pm}(t, t') &= \sqrt{\pi} z d_\rho t'^{1/2} (t - t')^{-1/2} (\operatorname{erf}(\beta_\pm(z, t)) - e^{-\beta_\pm^2(z, t)}); \\ Y_{2\pm}(t, t') &= e^{w_\pm(t, t')} \left[\sqrt{\pi} w_\pm^{1/2}(t, t') (\operatorname{erf}(E_\pm(t, t')) \mp \operatorname{erf}(w_\pm^{1/2}(t, t'))) + e^{-E_\pm^2(t, t')} \right]; \\ Y_{3\pm}(t, t') &= e^{w_\pm(t, t')} \left[\sqrt{\pi} \left(\frac{1}{2} + w_\pm(t, t') \right) (\operatorname{erf}(E_\pm(t, t')) \mp \operatorname{erf}(w_\pm^{1/2}(t, t'))) \mp \right. \\ &\quad \left. \mp \frac{z d_\rho \sqrt{t'}}{\sqrt{t - t'}} - e^{-E_\pm^2(t, t')} (E_\pm(t, t') \mp 2 w_\pm^{1/2}(t, t')) \right]; \\ Y_{4\pm}(t, t') &= e^{w_\pm(t, t')} \left[\sqrt{\pi} \left(\frac{1}{2} + w_\pm(t, t') \right) \operatorname{erfc}(E_\pm(t, t')) + E_\pm(t, t') e^{-E_\pm^2(t, t')} \right]; \\ Y_{5\pm}(t, t') &= e^{w_\pm(t, t')} \left[\sqrt{\pi} w_\pm^{1/2}(t, t') \operatorname{erfc}(E_\pm(t, t')) + e^{-E_\pm^2(t, t')} \right]; \\ \alpha(t, t') &= \lambda d_\rho^{-1} \sqrt{(t - t') t'}; \quad \beta_\pm(t, t') = d_\rho (t'(t - t'))^{1/2} (h \pm z t'); \\ w_\pm(t, t') &= z^2 d_\rho t' (t - t')^{-1} \pm z \lambda t' + \lambda (t - t'); \\ E_\pm(t, t') &= d_\rho (t'(t - t'))^{1/2} h \pm z d_\rho (t - t')^{-1} + \lambda \sqrt{(t - t') t'}. \end{aligned}$$

Зазначимо, що неоднорідна частина розв'язку (31) пропорційна кількості включень n_1 , а також безрозмірній величині $q = d_1/d_0 + \rho_1/\rho_0$.

ЧИСЛОВИЙ АНАЛІЗ УСЕРЕДНЕНОГО ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ

Числові розрахунки проводились у безрозмірних змінних [11] $\tau = d_0 t / z_0$, $\xi = z / z_0$, $z_0 = 1$ м. На рис. 3–8 проілюстровано характерні розподіли усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у випадку ерлангівського розподілу фаз для різних значень параметрів задачі та у різні моменти часу. При цьому, за базові приймалися такі значення коефіцієнтів: $d_1/d_0 = 10$; $\rho_1/\rho_0 = 1,1$; $n_1 = 50$; $\bar{h} = h/z_0 = 0,1$; $\tau = 2$; $n = 3$. На рис. 3–7 обчислення, проведені для $\mu = 0,3$, подані на рис. *a* та для $\mu = 1$ — на рис. *b*. Криві *a* (штрихові лінії) позначають концентрацію домішки в однорідному півпросторі з характеристиками матриці.

На рис. 3 наведено розподіли усередненої концентрації в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0,5; 1; 2; 5; 10$ (криві 1–5). На рис. 4 продемонстровано поведінку усередненого поля концентрації домішок у залежності від різних значень відношення кінетичних коефіцієнтів переносу $d_1/d_0 = 0,1; 0,5; 3; 5; 7; 10$ (криві 1–6). А рис. 5 за різних значень характерної безрозмірної товщини включень $\bar{h} = 0,001; 0,01; 0,05; 0,1; 0,2$ (криві 1–5).

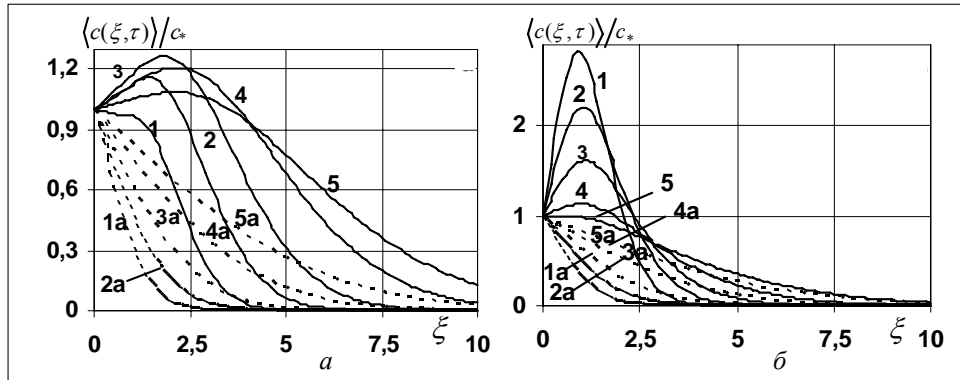


Рис. 3. Розподіли усередненої концентрації в різні моменти часу для $\mu = 0,3$ (а) та $\mu = 1$ (б)

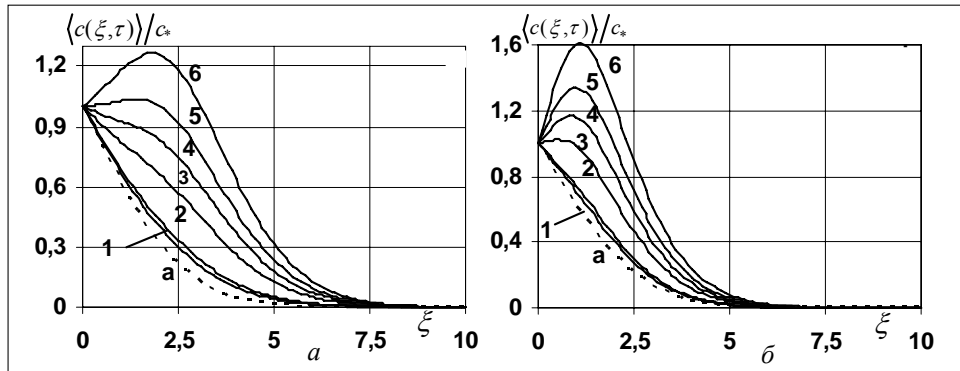


Рис. 4. Розподіли усередненої концентрації в залежності від різних значень відношення кінетичних коефіцієнтів переносу d_1/d_0 для $\mu = 0,3$ (а) та $\mu = 1$ (б)

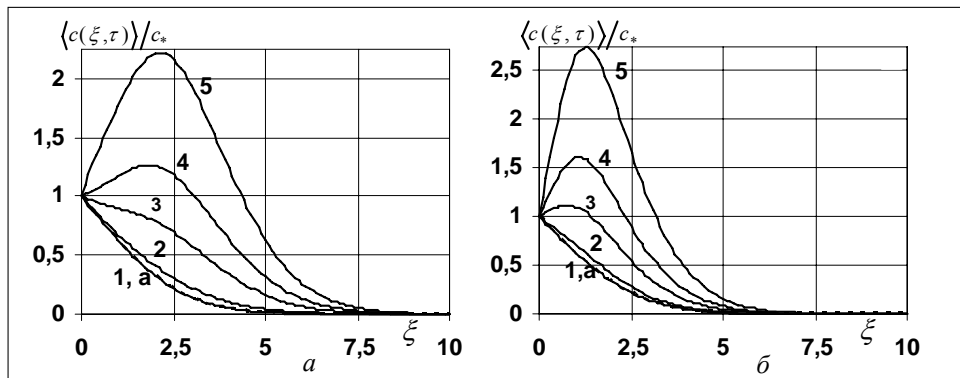


Рис. 5. Розподіли усередненої концентрації за різних значень характерної товщини прошарків \bar{h} для $\mu = 0,3$ (а) та $\mu = 1$ (б)

Рис. 4 зображено поведінку усередненого поля концентрації домішок у залежності від різних значень відношення кінетичних коефіцієнтів переносу $d_1/d_0 = 0,1; 0,5; 3; 5; 7; 10$ (криві 1–6). А рис. 5 за різних значень характерної безрозмірної товщини включень $\bar{h} = 0,001; 0,01; 0,05; 0,1; 0,2$ (криві 1–5).

Рис. 6 ілюструє вплив кількості прошарків на поведінку усередненої концентрації домішкових частинок; тут криві 1–6 відповідають значенням $n_1 = 3; 5; 10; 15; 25; 50$. На рис. 7 подано характерні розподіли функції $\langle c(\xi, \tau) \rangle / c_*$ в залежності від значення параметра функції ерлангівського розподілу $n = 1, 2, 3, 4, 5$ (криві 1–5).

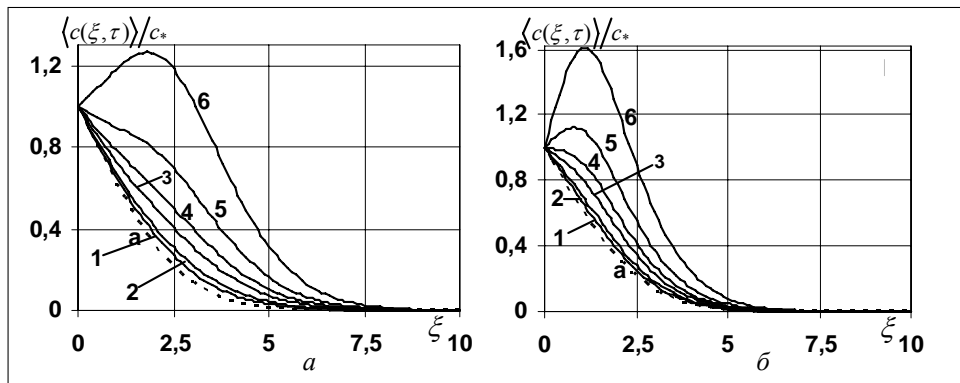


Рис. 6. Розподіли усередненої концентрації в півпросторі з різною кількістю прошарків n_1 в тілі для $\mu = 0,3$ (а) та $\mu = 1$ (б)

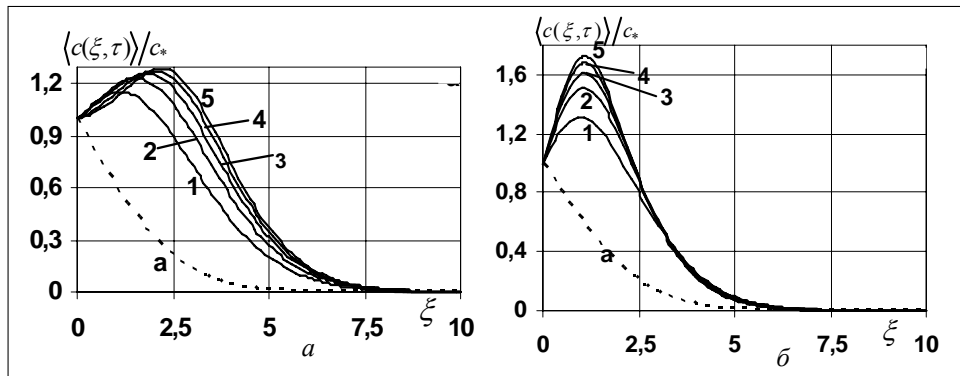


Рис. 7. Розподіли усередненої концентрації при різних значеннях параметра n для $\mu = 0,3$ (а) та $\mu = 1$ (б)

На рис. 8 наведено розподіли усередненої концентрації при різних значеннях параметра μ функції ерлангівського розподілу: $\mu = 0,1; 0,3; 0,5; 1; 2; 5$ (криві 1–6) у моменти безрозмірного часу $\tau = 2$ (рис. а) та $\tau = 5$ (рис. б).

Зазначимо, що параметри ерлангівського розподілу n та μ суттєво впливають на розподіли усередненої концентрації домішки в шаруватому півпросторі, проте якщо значення параметра μ впливає тільки на кількісні характеристики ерлангівського розподілу $f(z)$ (рис. 1), то його зміна веде до зміни поведінки функції $\langle c(\xi, \tau) \rangle / c_*$ (рис. 8). При цьому, зростання зна-

чення параметра μ призводить спочатку до зростання максимальних значень усередненої концентрації (криві 1–3, рис. 8), а потім — до поступового зменшення величини цих максимумів та їхнього наближення до поверхні (криві 3–6, рис. 8). Зміна іншого параметра ерлангівського розподілу n , що суттєво впливає на поведінку і значення $f(z)$ (рис. 1), не змінює поведінку функції $\langle c(\xi, \tau) \rangle / c_*$. При чому зі збільшенням параметра n максимум усередненої концентрації домішки зростає (рис. 7) і для малих μ зсувається вглиб тіла (рис. 7,а).

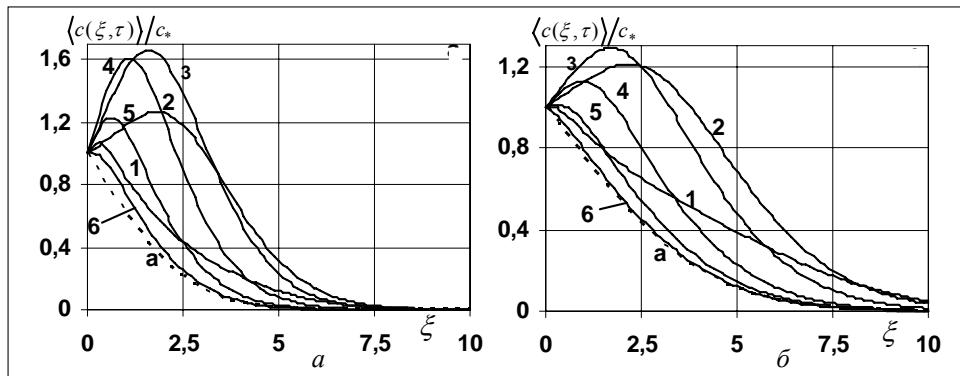


Рис. 8. Розподіли усередненої концентрації при різних значеннях параметра μ для $\tau = 2$ (а) та $\tau = 5$ (б)

Також зауважимо, що для часів, далеких від усталеного режиму, кількісні та якісні характеристики розподілів концентрації домішки в однорідному й неоднорідному тілі суттєво відрізняються (рис. 3).

Для малих часів характерна поява приповерхневого максимуму усередненої концентрації (рис. 3), який з часом зростає (криві 1–3 рис. 3,а), для малих μ зсувається в глиб шаруватого півпростору (рис. 3,а), а потім спадає доки не співпадає з концентрацією домішкових частинок в однорідному півпросторі.

Зазначимо, що зміна всіх коефіцієнтів задачі, не тільки впливає на значення усередненої концентрації, але й може призвести до зміни поведінки функції $\langle c(\xi, \tau) \rangle / c_*$ (рис. 4–6). Наприклад, для малих відношень кінетичних коефіцієнтів переносу d_1/d_0 розподіл усередненої концентрації подібний до розподілу концентрації в однорідному тілі (криві 1–2, рис. 4), а зі збільшенням величини d_1/d_0 усереднена концентрація зростає, і можлива поява її максимуму в приповерхневій області (криві 5–6, рис. 4,а та криві 3–6, рис. 4,б).

Якщо товщина включень є малою (рис. 5) або таких прошарків є мало (рис. 6), то концентрація в однорідному і неоднорідному півпросторах або співпадають (криві 1; 2, рис. 5), або не суттєво відрізняються (криві 1 та 2, рис. 6). У випадку великої кількості прошарків (рис. 6) або значної їхньої характерної товщини (рис. 5) спостерігається суттєве накопичення домішкової речовини в околі границі тіла, де діє джерело маси.

ВИСНОВКИ

Таким чином з використанням апарату теорії узагальнених функцій контактну задачу дифузії домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному шаруватому півпросторі зведено до рівняння масопереносу частинок у всьому тілі. Побудовано інтегродиференціальне рівняння розв'язано шляхом ітерування. Розв'язок отримано у вигляді ряду Неймана. Зауважимо, що спрямовуючи часову змінну до безмежності ряд Неймана стає розбіжним, і тому стаціонарний випадок потребує окремого розгляду.

Усереднення поля концентрації проведено за ансамблем конфігурацій фаз із ерлангівською функцією розподілу включень. Одержано в загальному випадку формулу для визначення усередненого поля концентрації в такому тілі та наведено розрахункові формули в часткових випадках. Проведено числовий аналіз отриманих результатів у залежності від характеристик середовища та параметрів ерлангівського розподілу. Зокрема показано, що зростання значення параметра μ призводить спочатку до зростання максимальних значень усередненої концентрації, а потім до поступового зменшення величини цих максимумів та їхнього наближення до поверхні.

ЛІТЕРАТУРА

1. Keller J.B. Flow in random porous media // *Transport in Porous Media*. — 2001. — 43. — P. 395–406.
2. Zhu Y., Fox P.J. Smoothed particle hydrodynamics model for diffusion through porous media // *Transport in Porous Media*. — 2001. — 43. — P. 441–471.
3. Mikdam A., Makardi A., Ahzi S., Garmestani H., Li D.S., Remond Y. Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory // *J. Mech. and Phys. of Solids*. — 2009. — 57. — P. 76–86.
4. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятности и математической статистике. — М.: Наука, 1985. — 640 с.
5. Мюнстер А. Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971. — 295 с.
6. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. — Київ: Наукова думка, 2009. — 302 с.
7. Краснов М.Л. Интегральные уравнения. — М.: Наука, 1975. — 300 с.
8. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1976. — 527 с.
9. Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II, Случайные поля. — М.: Наука, 1978. — 436 с.
10. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. — М.: Мир, 1979. — 830 с.
11. Лыков А.В. Теория теплопроводности. — М.: Высшая школа, 1978. — 463 с.

Надійшла 09.11.2011